

УДК 628.394.57:577.472

Василенко С.Л.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОВМЕСТНОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ БИОГЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И РАСТВОРЕННОГО КИСЛОРОДА ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КАЧЕСТВА ВОДЫ

Азот и фосфор – важнейшие биогенные элементы, содержание в воде которых влияет на состояние биоценоза, процессы самоочищения и в целом определяет биологическую продуктивность природных вод. Основными процессами, определяющими их круговорот и распределение в воде, являются фотосинтез и разложение органических веществ [1].

При изучении вопросов количественной оценки и прогнозирования качества воды, евтрофирования (повышения биопродуктивного потенциала) водных объектов эти биогенные элементы включаются как компоненты в экологические модели разной сложности, представляемые обычно в виде систем дифференциальных уравнений в частных производных [2-4].

Для решения задач оптимизации и прогнозирования качества воды в области охраны вод наиболее приемлемыми представляются модели в виде аналитических зависимостей, вид которых отражает существенные причинно-следственные связи реальных внутриводоемных процессов, а параметры оцениваются по данным натурных измерений с применением статистических методов. В этой связи практический интерес представляет модель совместной последовательно-параллельной трансформации любого конечного числа веществ в виде формульных соотношений [5] и, в частности, ее статистическая модификация для моделирования азотосодержащих компонент [6].

Целью настоящей работы является дальнейшее развитие принятых основных направлений [5, 6], но уже с учетом совместной трансформации в водной среде соединений азота, фосфора, а также изменения растворенного кислорода и биохимического потребления кислорода – показателя косвенной оценки суммарного содержания в воде легкоокисляющихся органических веществ.

За основу приемем относительно несложную, но одновременно практически важную модель взаимосвязей компонент [2], приемлемую для выполнения инженерных расчетов (рис. 1).

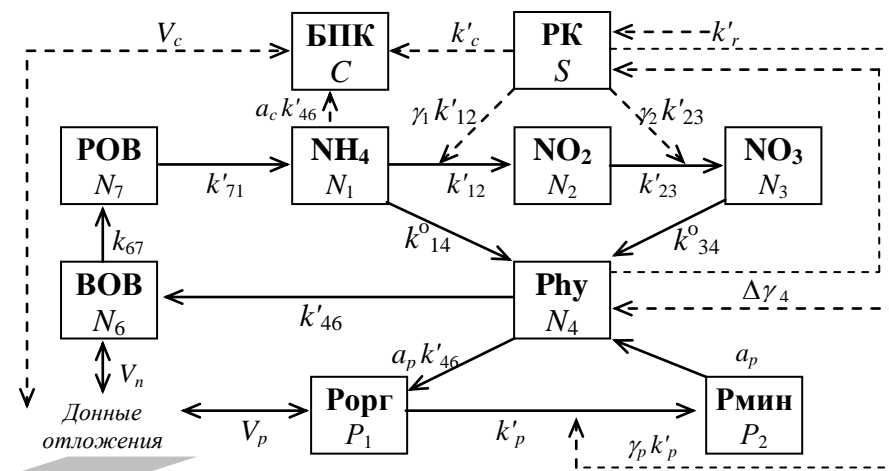


Рисунок 1 – Схема взаимосвязи компонент модели

По данной схеме растворенное органическое вещество (РОВ), которое образуется в результате трансформации взвешенного органического вещества (ВОВ) и выделений фитопланктона (Phy), в результате нитрификации преобразуется последовательно в аммонийный (NH_4), нитритный (NO_2) и нитратный (NO_3) азот. Фитопланктон потреб-

ляет NH_4 , NO_3 , минеральный фосфор (Рмин), который может быть лимитирующим фактором для его роста, а в результате жизнедеятельности выделяет органический фосфор (Рорг). ВОВ и Рорг подвержены процессам осаждения или взмучивания. На протекание внутриводных процессов влияют внешние источники биогенных и взвешенных веществ, в частности, донные отложения. Формирование качества воды сопровождаются также изменением содержания растворенного кислорода в зависимости от соотношения процессов продуцирования (фотосинтеза) и потребления (дыхания организмов, деструкции органических веществ).

В модели приняты следующие допущения, которые не влияют на суть излагаемого подхода и могут быть сравнительно легко учтены при повышении уровня сложности модели:

⇐ не учитываются нитрифицирующие бактерии типа *Heterotrophs*, *Nitrosomonas*, *Nitrobacter*, которые не подлежат стандартным измерениям;

⇐ не учитывается зоопланктон, поскольку его продуктивность обычно не превышает 10 % от продуктивности фитопланктона [1], и он вносит наименьший вклад в массу и деструкцию органического вещества;

⇐ фитопланктон характеризуется как гомогенная масса с осредненными характеристиками.

Система дифференциальных уравнений согласно принятой схеме взаимосвязей компонент имеет вид (для удобства сопоставления результатов нумерация компонент сохранена, как в [2]):

$$\left\{ \begin{array}{l} LN_1 = k'_{71}N_7 - k'_{12}N_1 - k'_{14}N_4 + f_1; \\ LN_2 = k'_{12}N_1 - k'_{23}N_2 + f_2; \\ LN_3 = k'_{23}N_2 - k'_{34}N_4 + f_3; \\ LN_4 = (k'_{14} + k'_{34})N_4 - k'_{46}N_4 + f_4; \\ LN_6 = k'_{46}N_4 - k'_{67}N_6 - V_n + f_2; \\ LN_7 = k'_{67}N_6 - k'_{71}N_7 + f_7; \\ LP_1 = a_p k'_{46}N_4 - k'_p P_1 - V_p + f_{p1}; \\ LP_2 = k'_p P_1 - a_p (k'_{14} + k'_{34})N_4 + f_{p2}; \\ LC = a_c k'_4 N_4 - k'_c C - V_c + f_c; \\ LS = -k'_c C - \gamma_1 k'_{12}N_1 - \gamma_2 k'_{23}N_2 - \gamma_p k'_p P_1 + \frac{\Delta\gamma_4}{n} k'_{46}N_4 + k'_r (S_n - S) + f_s, \end{array} \right. \quad (1)$$

где $L \equiv \frac{d}{dt}$ – дифференциальный оператор, $k'_{\xi 4} = \frac{k_f \mu_{\xi 4} \bar{N}_{\xi}}{(k_{s\xi 4} + \bar{N}_{\xi})} m_p$, $\xi = 1, 3$;

$V_n = k_{cd}(N_6 - k_{cn}V)$, $V_p = a_p k_{cp}V_n$, $V_c = k_{cd}(C - k_{cc}V)$; $m_p = P_2 / (k_{sp} + P_2)$; азот: N_1 – аммонийный (NH_4), N_2 – нитритный (NO_2), N_3 – нитратный (NO_3), N_4 – фитопланктона (Phy), N_6 – взвешенного органического вещества (ВОВ), N_7 – растворенного органического вещества (РОВ); P_1 – фосфор органический (Рорг), P_2 – фосфор минеральный (Рмин), C – полное биохимическое потребление кислорода (БПК), S – растворенный кислород (РК); \bar{N}_{ξ} – усредненные концентрации компонент на некотором квазистационарном промежутке времени; k'_{ii} – коэффициенты, характеризующие скорость транс-

формации i -той компоненты в u -тую или скорость отмирания фитопланктона; $\mu_{\xi 4}$, $k_{s\xi 4}$ – максимальная скорость роста популяций фитопланктона и коэффициенты полунасыщения по кинетике Михаэлиса-Ментен, Моно (k_{sp} – по фосфору); $\Delta\mu_4$ – разница между коэффициентом фотосинтетической активности μ_4 и интенсивности потребления кислорода фитопланктоном на дыхание μ_4^0 , k_f – коэффициент освещенности; k_{cd} – коэффициент седиментации – процесса оседания мелких взвешенных частиц под действием гравитационного поля; V – равновесная концентрация взвесей, k_{cn} , k_{cp} , k_{cc} – коэффициенты связи органического азота, фосфора и БПК с этими фракциями; γ_1 γ_2 γ_p – стехиометрические коэффициенты (удельный расход РК на окисление соответствующего вещества); $a_p = 0,011/n$, $a_c = 1,5/n$ – коэффициенты пересчета концентрации планктона из единиц азота в единицы фосфора и сухое органическое вещество, $n = 0,076$ – удельное содержание азота в сухом органическом веществе планктона; k'_r – коэффициент ре-аэрации, S_n – концентрация предельного насыщения РК (равновесная концентрация РК, соответствующая его максимальной растворимости при данной температуре и давлении); f_1, \dots, f_c, f_s – функции внешних источников.

Для представления аналитического решения в форме, удобной для практической реализации на ПЭВМ, целесообразно выполнить некоторые изменения обозначений и нумераций исследуемых компонент согласно табл. 1

Поменяв нумерацию компонент модели в соответствии с табл. 1, решение системы уравнений (1) можно представить в следующем виде [5]:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_i = C_{0i}k_i + q_i f_i^* + P_i, \quad i = \overline{1, I_j}; \\ P_i = \sum_z \sum_{m=1}^{i_1} \sum_{u=m}^{i_3} \alpha_{im}^{(z)} (C_{0m} F_{i b_u} + q_m x G_{i b_u}) \prod_{s=m}^{i_3} k_{b_s b_{s+1}}'' \rho_{b_s b_u}, \quad i \geq i_2; \\ f_i^* = \frac{k_i - 1}{\ln k_i}; \quad F_{i r} = K'_r \frac{(k_i - k_r)}{(K'_r - K'_i)}; \quad G_{i r} = K'_r \frac{f_i^* - f_r^*}{(K'_r - K'_i)}; \\ \rho_{su} = \frac{K'_s}{(K'_s - K'_u)} \quad \text{ëëë } 1 \text{ ï ðë } s = u; \quad k_i = \exp(-K'_i t), \quad q_i = q'_i t, \end{array} \right. \quad (2)$$

где I_j – количество компонент по одной из j -той последовательной цепочки их транс-

формации, $K'_i = \sum_{u=i+1}^I k'_{iu} + v'_i$ – обобщенный коэффициент трансформации i -той компо-

ненты в остальные – по последовательной цепочке по мере возрастания индекса u : $i+1 \leq u \leq I$; k'_{iu} – коэффициенты трансформации компонент (нумерация соответствует концентрациям C_i); v'_i – обобщенный коэффициент обмена i -той компоненты с другими подуровнями такой, что $v'_i < 0$ – соответствует поступлению компоненты, $v'_i > 0$ – ее уходу; C_{0i} – начальные концентрации, $q'_i = \text{const}$ – функции внешних источников, $k'_{iu} = k'_{iu} / K'_i$ – нормированный (безразмерный) коэффициент трансформации между парой i, u -тых компонент; $\alpha_{im}^{(z)}$ – параметр долевого участия i -той компоненты на m -тую; i_1, i_2 – номера узлов соответственно перед первой и после последней удаленной вершиной графа в z -м столбце матрицы взаимосвязей компонент b_{rz} [5]; \tilde{x} – количество пропускаемых компонент при формировании параллельных цепочек, $i_3 = i - 1 - \tilde{x}$. Индекс z в b_{rz} для простоты записи в (2) опущен.

Таблица 1 – Сопоставление обозначений компонент и параметров модели

Изменение обозначений			$v'_i =$	$q'_i =$		$k'_{iu} =$									
Phy	N_4	C_1	0	f_4	1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
BOB	N_6	C_2	k_{cd}	$f_6 + k_{cd}k_{cn}V$	2	k'_{46}	0	0	a_4	0	b_4	0	$a_4 + b_4$	0	0
POB	N_7	C_3	0	f_7	3		k'_{67}	0	0	0	0	0	0	0	0
NH ₄	N_1	C_4	0	f_1	4			k'_{71}	0	0	0	0	0	0	0
NO ₂	N_2	C_5	0	f_2	5				k'_{12}	0	0	0	0	0	0
NO ₃	N_3	C_6	0	f_3	6					k'_{23}	0	0	0	0	0
Рорг	P_1	C_7	k_{cd}	$f_{p1} + k_{cd}k_{cp}V$	7						k'_p	0	0	0	0
Рмин	P_2	C_8	0	f_{p2}	8							0	0	0	0
БПК	C	C_9	k_{cd}	$f_c + k_{cd}k_{cc}V$	9								k'_c	0	0
РК	S	C_{10}	0	$f_s + k_rS_n$	10										k'_r

Главное отличие представленного решения от [5, 6] заключается в присутствии в нем матрицы $\alpha^{(z)}$, элементы которой характеризуют вклад соответствующей компоненты при ее трансформации в другое вещество. В частности, для группы азотосодержащих соединений при их последовательном превращении – матрица $\alpha^{(z)} \equiv 1$. По другим компонентам отдельные элементы уже не равны нулю, что обусловлено присутствием в модели параметров типа $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_p, a_p, a_c$ и т.п.

Значения элементов матрицы $\alpha^{(z)}$ полагаются равными 1, затем отдельные элементы меняются на соответствующие значения согласно таблице 2.

Таблица 2 – Значения элементов матрицы $\alpha_{im}^{(z)}$ ($m = \overline{1, I-1}$) и последовательности b трансформируемых компонент для фосфора, БПК и РК

	Фосфор	БПК	Растворенный кислород				
			по NH ₄	по NO ₂	по БПК	по Рорг	по Phy
α	$\alpha_{lm} = a_p$	$\alpha_{ml} = a_c$	$\alpha_{ml} = -\gamma_1$	$\alpha_{ml} = -\gamma_2$	$\alpha_{13} = -a_c$ $\alpha_{23} = -1$	$\alpha_{13} = -\gamma_p a_p$ $\alpha_{23} = -\gamma_p$	$\alpha_{12} = (\gamma_p - \gamma'_p)/n$
I	3	2	5	6	3	3	2
b	1	1	1	1	1	1	1
	7	9	2	2	9	7	10
	8		3	3	10	10	
			4	4			
			10	5			
z	1	1		10	5		

С целью проверки корректности полученных аналитических соотношений (2) проводилось сопоставление результатов расчета при решении системы дифференциальных уравнений (1) в математической системе MathCAD 8.0 Professional с помощью программы rkfixed – метод Рунге-Кутты (rk) 4-го порядка с фиксированным (fixed) шагом интегрирования. Различие не превышает 10^{-8} , то есть находится в пределах точности решения самим методом Рунге-Кутты. Изменение расчетных значений концентраций компонент в зависимости от некоторых параметров модели представлены в табл. 3.

Таблица 3 – Тенденции изменения расчетных значений концентраций взаимосвязанных компонент в зависимости от параметров модели (\uparrow – увеличение, \downarrow – уменьшение)

Параметры модели		Phy	BOB	POB	NH ₄	NO ₂	NO ₃	Porg	Pмин	БПК	РК
Коэффициент освещенности	$k_f \uparrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow
Коэффициент седиментации	$k'_{cd} \uparrow$	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow
Равновесная концентрация	$V \uparrow$	–	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow
Максимальные скорости роста популяций фитопланктона	$\mu'_{14} \uparrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow
	$\mu'_{34} \uparrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow

Выводы. Вследствие аналитического представления модель совместной трансформации биогенных элементов и растворенного кислорода приемлема для решения задач оптимизации и краткосрочного прогнозирования качества воды в области охраны вод. Модель достаточно полно описывает процессы изменения компонент, проста в эксплуатации, допускает простые процедуры идентификации ее параметров по данным натурных измерений и может быть легко модифицирована к статистическому виду [6].

Литература

1. Зенин А.А., Белоусов Н.В. Гидрохимический словарь. – Л.: Гидрометеиздат, 1988. – 240 с.
2. Еременко Е.В. Экологические модели разной сложности для прогнозирования качества воды// Проблемы охраны навколишнього природного середовища та техногенної безпеки: Зб. наук. пр. /УкрНДІЕП, Харків, 2000. – С. 90-99.
3. Леонов А.В. Математическая модель совместной трансформации соединений азота, фосфора и кислорода в водной среде: ее применение для анализа динамики компонент в евтрофном озере// Водные ресурсы. – 1989, № 2. – С. 105-123.
4. Айзатуллин Т.А., Шамардина И.П. Математическое моделирование экосистем континентальных водотоков и водоемов// Итоги науки и техники. Сер. Общая биология, биоценология, гидробиология. Т. 5. М.: ВИНТИ, 1980. – С. 154-228.
5. Василенко С.Л. Моделирование процессов последовательно-параллельной трансформации веществ для решения задач оптимизации в области охраны вод// Інтегровані технології та енергозбереження. – 2004, № 1. – С. 104-110.
6. Василенко С.Л. Моделирование последовательной трансформации веществ в водотоках// Екологія і ресурси: Зб. наук. праць. – К.: УІНСІР РНБОУ, 2003. – Вип.7. – С. 56-64.

УДК 628.394.57:577.472

Василенко С.Л.

МОДЕЛЮВАННЯ СПІЛЬНОЇ ТРАНСФОРМАЦІЇ БІОГЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ І РОЗЧИНЕНОГО КИСНЮ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ЯКОСТІ ВОДИ

У статті викладений підхід до розробки математичної моделі, що описує процеси сумісного трансформування шести компонентів, які містять азот: амонійний, нітритний, нітратний, фітопланктону, завислих і розчинених органічних речовин, а також фосфору, біохімічного споживання кісню та розчинного кісню. Отримана модель відсвічує основні причинно-наслідкові зв'язки реальних процесів трансформації компонентів і придатна для практичного використання при рішенні задач прогнозування якості води та оптимізації в області охорони вод.